

BUNDESREPUBLIK DEUTSCHLAND

**PRIORITY
DOCUMENT**
SUBMITTED OR TRANSMITTED IN
COMPLIANCE WITH RULE 17.1(a) OR (b)



REC'D 05 AUG 2004

WIPO

PCT

16 JUL 2004

EP04/5112

**Prioritätsbescheinigung über die Einreichung
einer Patentanmeldung**

Aktenzeichen: 103 30 865.2

Anmeldetag: 09. Juli 2003

Anmelder/Inhaber: Symrise GmbH & Co KG, 37603 Holzminden/DE

Bezeichnung: 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on und
4,8-Dimethylnonan-2-on als Riechstoffe

IPC: A 61 K, A 61 G

Die angehefteten Stücke sind eine richtige und genaue Wiedergabe der ursprünglichen Unterlagen dieser Patentanmeldung.

München, den 08. Juli 2004
Deutsches Patent- und Markenamt
Der Präsident
Im Auftrag

Schäfer

Bremen
Patentanwälte
European Patent Attorneys
Dipl.-Ing. Günther Eisenführ
Dipl.-Ing. Dieter K. Speiser
Dr.-Ing. Werner W. Rabus
Dipl.-Ing. Jürgen Brügge
Dipl.-Ing. Jürgen Klinghardt
Dipl.-Ing. Klaus G. Göken
Jochen Ehlers
Dipl.-Ing. Mark Andres
Dipl.-Chem. Dr. Uwe Stilkemböhrer
Dipl.-Ing. Stephan Keck
Dipl.-Ing. Johannes M. B. Wasiljeff
Patentanwalt
Dipl.-biotechnol. Heiko Sendrowski

Rechtsanwälte
Ulrich H. Sander
Christian Spintig
Sabine Richter
Harald A. Förster

Martinistrasse 24
D-28195 Bremen
Tel. +49-(0)421-3635 0
Fax +49-(0)421-3378 788 (G3)
Fax +49-(0)421-3288 631 (G4)
mail@eisenfuhr.com
http://www.eisenfuhr.com

Hamburg
Patentanwalt
European Patent Attorney
Dipl.-Phys. Frank Meier

Rechtsanwälte
Rainer Böhm
Nicol A. Schrömgens, LL. M.

München
Patentanwälte
European Patent Attorneys
Dipl.-Phys. Heinz Nöth
Dipl.-Wirt.-Ing. Rainer Fritzsche
Lbm.-Chem. Gabriele Leißler-Gerstl
Dipl.-Ing. Olaf Ungerer
Patentanwalt
Dipl.-Chem. Dr. Peter Schuler

Berlin
Patentanwälte
European Patent Attorneys
Dipl.-Ing. Henning Christiansen
Dipl.-Ing. Joachim von Oppen
Dipl.-Ing. Jutta Kaden
Dipl.-Phys. Dr. Ludger Eckey

Alicante
European Trademark Attorney
Dipl.-Ing. Jürgen Klinghardt

Bremen, 07. Juli 2003
Unser Zeichen: HA 3848-01DE UST/rab
Durchwahl: 0421/36 35 13

Anmelder/Inhaber: Symrise GmbH & Co. KG
Amtsaktenzeichen: Neuanmeldung

Symrise GmbH & Co. KG
Mühlenfeldstraße 1, 37603 Holzminden

4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on und 4,8-Dimethylnonan-2-on als Riechstoffe

Die vorliegende Erfindung betrifft die Verwendung von 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on, 4,8-Dimethylnonan-2-on oder einer Mischung dieser Verbindungen als Riechstoffe.

5 In der Parfümindustrie besteht generell ein Bedarf an Rosenriechstoffen, da den Konsumenten laufend neue und moderne Parfüme mit Rosenduft zur Verfügung gestellt werden sollen. Riechstoffe mit Rosengeruch werden in großer Menge und ungezählten Variationen in Parfüms, Riechstoffmischungen (Parfümkompositionen) und Parfümierungen für die verschiedensten Anwendungsgebiete eingesetzt.

10 Zu den bekannten Rosenriechstoffen zählen die Verbindungen Geraniol (3,7-Dimethyl-2,6-octadien-1-ol) und Citronellol (3,7-Dimethyl-2-octen-1-ol); es hat

sich jedoch inzwischen herausgestellt, dass viele Menschen auf diese Verbindungen mit Unverträglichkeiten, wie z. B. allergischen Reaktionen, reagieren.

Es besteht daher in der Parfümindustrie nicht nur ein genereller Bedarf an weiteren Rosenriechstoffen, sondern auch ein spezieller Bedarf an Rosenriechstoffen, die keine derartigen negativen toxikologischen Eigenschaften besitzen und vorteilhafterweise dazu in der Lage sind, die bislang häufig eingesetzten Rosenriechstoffe Geraniol und Citronellol in Parfümkompositionen zu ersetzen.

Es war die Aufgabe der vorliegenden Erfindung, Rosenriechstoffe anzugeben, welche dem genannten Anforderungsprofil entsprechen.

Die Suche nach geeigneten Rosenriechstoffen, die zur vorliegenden Erfindung führte, wurde durch folgende Sachverhalte erschwert:

- Die Mechanismen der Geruchswahrnehmung sind nicht ausreichend bekannt.
- Die Zusammenhänge zwischen der speziellen Geruchswahrnehmung einerseits und der chemischen Struktur des zugehörigen Riechstoffs andererseits sind nicht hinreichend erforscht.
- Häufig bewirken bereits geringfügige Änderungen am strukturellen Aufbau eines bekannten Riechstoffs starke Änderungen der sensorischen Eigenschaften und beeinträchtigen die Verträglichkeit für den menschlichen Organismus.

Der Erfolg der Suche nach geeigneten Rosenriechstoffen hängt deshalb stark von der Intuition des Suchenden ab.

Es hat sich nun überraschenderweise gezeigt, dass die Verbindungen 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on und 4,8-Dimethylnonan-2-on geeignet sind, die gestellte Aufgabe zu lösen.

Die beiden genannten Verbindungen besitzen jeweils einen rosenartigen Geruch sowie anwendungstechnische Eigenschaften, die es ermöglichen, sie in Parfümkompositionen anstelle der üblichen (aber allergenen) Rosenriechstoffe Geraniol und Citronellol einzusetzen. Die Übereinstimmung der geruchlichen Profile von Geraniol und Citronellol einerseits und 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on und 4,8-Dimethylnonan-2-on andererseits ist überraschend, da es sich bei den letzt genannten Verbindungen nicht um primäre Alkohole handelt, sondern um Ketone, also um Stoffe mit einer Funktionalität, die sich von der primärer Alkohole stark unterscheidet. Üblicherweise führen derartig starke Unterschiede in den funktionellen Gruppen von Verbindungen auch bei ansonsten vorhandener struktureller Ähnlichkeit zu sehr unterschiedlichen sensorischen Eigenschaften.

Zur Verbindung 4,8-Dimethylnonan-2-on gab es bislang keine sensorische Beschreibung. Hinsichtlich der Verbindung 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on ist zwar im Indian Perfumer 22 (4), Seite 225 – 228 (1978) eine Geruchsbeschreibung offenbart, doch diese lautet: „Kokosnuss, rosig“, so dass davon ausgegangen werden musste, dass das 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on nicht als Ersatzstoff für Geraniol und Citronellol geeignet ist. Denn zwar wird gemäß der Offenbarung im Indian Perfumer auch ein rosiger Geruchscharakter attestiert, doch wurde diese Feststellung mit der weiteren Feststellung verknüpft, dass ein primärer kokosnussartiger Geruch vorhanden sein soll. Eigene Untersuchungen haben nun überraschenderweise gezeigt, dass die im Indian Perfumer angegebene Geruchsbeschreibung nicht korrekt ist. Ein kokosnussartiger Geruch ist nämlich bei der sensorischen Untersuchung des 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on nicht zu beobachten; die Verbindung besitzt vielmehr einen strahlend rosigen, fruchtigen, natürlichen und an Teerosen erinnernden Geruch und ist gerade deshalb als Ersatzstoff für Geraniol und Citronellol hervorragend geeignet.

Gleiches gilt für die Verbindung 4,8-Dimethylnonan-2-on, die einen frisch citronelloligen, rosigen, an Citronelloöl erinnernden Geruch besitzt.

Die vorliegende Erfindung betrifft insbesondere die Verwendung von 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on, 4,8-Dimethylnonan-2-on oder einer Mischung dieser Verbindungen zum Vermitteln eines Rosengeruchs, der nicht von einer Kokosnuss-Geruchsnote begleitet ist. Insbesondere können die besagten Verbindungen oder deren Mischungen zur Herstellung einer Parfümkomposition mit einem Rosengeruch eingesetzt werden, der nicht von einer Kokosnuss-Geruchsnote begleitet ist.

Die Erfindung betrifft aber hinsichtlich des 4,8-Dimethylnonan-2-on auch ganz allgemein dessen Verwendung als Riechstoff.

Interessanterweise besitzt im Gegensatz zu den Verbindungen 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on und 4,8-Dimethylnonan-2-on das entsprechende α , β -ungesättigte Keton 4,8-Dimethyl-3,7-nonandien-2-on einen eher citrusartigen Geruch, der es nicht als Ersatzprodukt für Geraniol und Citronellol qualifiziert.

Die vorliegende Erfindung betrifft auch Parfümkompositionen mit einem Rosengeruch, umfassend

- eine organoleptisch wirksame Menge an 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on, 4,8-Dimethylnonan-2-on oder einer Mischung dieser Verbindungen

sowie

- zumindest einen weiteren Riechstoff.

Der oder die weiteren Riechstoffe können dabei insbesondere aus den folgenden Gruppen I und II ausgewählt sein, von denen die Gruppe I

Rosenriechstoffe im engeren Sinne umfasst, während die Gruppe II Stoffe umfasst, die selbst keine Rosennote haben, aber gute Effekte in Rosenkombinationen ergeben, z.B. Vanillin u. ä. sowie Moschus-Riechstoffe. In den Gruppen I und II unterstrichen sind Verbindungen, die sensibilisierende/allergenisierende Wirkung haben sowie Naturprodukte, die solche Verbindungen enthalten. Der Einsatz dieser Verbindungen ist weniger bevorzugt.

Gruppe I:

Geranylformiat; Geranylacetat; Geranylpropionat; Geranylisobutyrat; Geranylbutyrat; Geranylisovalerianat; Geranyltiglinat; Geranylbenzoat; Citronellylformiat; Citronellylacetat; Citronellylpropionat; Citronellylisobutyrat; Citronellylbutyrat; Citronellylisovalerianat; Citronellyltiglinat; Citronellylbenzoat; Phenylethylalkohol; Phenylacetaldehyd; Phenylacetaaldehyddimethylacetal; Phenylethylformiat; Phenylethylacetat; Phenylethylpropionat; Phenylethylisobutyrat; Phenylethylbutyrat; Phenylethylpivalat; Phenylethylisovalerianat; Phenylethyl-2-ethylbutyrat; Phenylethyltiglinat; Phenylethylbenzoat; Phenylethylphenylacetat; 2-Phenoxyethylisobutyrat; Geranylmethylether; Rosenoxid; Phenylethylmethylether; Phenylethylethylether; Phenylethylisoamylether; 2-Methoxybenzylethylether; α -Trichlormethylbenzylacetat; $\alpha,3,3$ -Trimethylcyclohexanmethylacetat; 2,4,6-Trimethyl-3-cyclohexenmethanol; N,N-Diethyl-2-ethylhexansäureamid; 3,7-Dimethyloctanol; Geranylaceton; Linalool; 3,7-Dimethyl-1,6-nonadien-3-ol; Nerolidol; Farnesol; 9-Decenol; 9-Decenylacetat; Decanal; 10-Undecenol; 10-Undecenol; Citronellyloxyacetaldehyd; 3,7-Dimethyloctanylacetaldehyd; 2-Methyl-5-phenylpentanol; 2-Methyl-5-phenylpentanal; 3-Methyl-5-phenylpentanol; Benzophenon; Diphenyloxid; Diphenylmethan; α -Damascon; β -Damascon; δ -Damascon; γ -Damascon; β -Damascenon; 1-(2,4,4-Trimethyl-2-cyclohexenyl)-2-buten-1-on; Rosenöl; Rosenabsolue; Geraniumöl.

Gruppe II:

Palmarosaöl; Citronenöl; Patchoulyöl; Nelkenöl; Ylang-Ylang-Öl; Jasminabso-
lue; Kohlensäureethyl-2,3,6-trimethylcyclohexylester; Hexanal; Heptanal; Oc-
5 tanal; Nonanal; Hexanol; Heptanol; Octanol; Nonanol; Decanol; Undecanol;
Dodecanol; Hexylacetat; Heptylacetat; Octylacetat; Nonylacetat; Decylacetat;
Undecylacetat; Dodecylacetat; Benzylacetat; Benzylbutyrat; Benzylbenzoat;
Methylphenylacetat; Ethylphenylacetat; alpha-Terpineol; 4,4a,5,9b-
Tetrahydro-2,4-dimethylindeno[1,2-d]-m-dioxin; 4,4a,5,9b-
10 Tetrahydroindeno[1,2-d]-m-dioxin; Ethyl-2-ethyl-6,6-dimethyl-2-
cyclohexencarboxylat; Ethyl-2,3,6,6-tetramethyl-2-cyclohexencarboxylat; E-
thylsafranat; Methyl-6,6-dimethyl-2-methylencyclohexancarboxylat; Eugenol;
Isoeugenol; Lavendelöl; Guajakholzöl; alpha-Ionon; beta-Ionon; Cinnamylal-
kohol; 3-Phenylpropanol; Cinnamylacetat; 3-Phenylpropylacetat; alpha-Iron;
15 cis-3-Hexenol; cis-3-Hexenylacetat; cis-3-Hexenylisobutytrat; Vanillin; Ethylva-
nillin; Heliotropin; Cumarin; Ambrinol; Indol; 3a,6,6,9a-
Tetramethyldodecahydronaphtho[2,1-b]furan; 5-Cyclohexadecen-1-on; 6,7-
Dihydro-1,1,2,3,3-pentamethyl-4(5H)-indanon; 8-Cyclohexadecen-1-on; 9-
Cycloheptadecen-1-on; Cyclopentadecanon; Cyclohexadecanon;

20. Üblicherweise wird nicht nur ein weiterer Riechstoff vorhanden sein, sondern
zwei, drei oder noch mehr weitere Riechstoffe.

Wie bereits erwähnt, sind die Verbindungen 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on und
4,8-Dimethylnonan-2-on sowie deren Mischungen besonders zur Kreation von
Parfümkompositionen geeignet, deren Rosengeruch im Vordergrund stehen
25 soll. Dementsprechend wird der zumindest eine weitere Riechstoff auch be-
vorzugt aus der Gruppe von Riechstoffen mit Rosengeruch ausgewählt. Bei-
spiele für derartige Riechstoffe mit Rosengeruch sind die der obigen Gruppe I.

Auch insoweit gilt natürlich, dass üblicherweise nicht nur ein weiterer Rosen-
riechstoff eingesetzt wird, sondern zwei, drei oder mehr.

Die Verbindungen 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on und 4,8-Dimethylnonan-2-on besitzen kein nennenswertes allergenes Potential. Dementsprechend ist es in der Regel vorteilhaft, sie in Parfümkompositionen auch nicht mit Riechstoffen zu kombinieren, die allergene Eigenschaften besitzen. Üblicherweise wird eine erfindungsgemäße Parfümkomposition daher keine Riechstoffe aus der folgenden Gruppe von Verbindungen umfassen, deren allergenes Potential bekannt ist. Eine gewisse Ausnahme stellen insoweit allerdings die unterstrichenen Verbindungen dar, bei denen es sich um Rosenriechstoffe handelt und deren Einsatz insbesondere in geringen Mengen in manchen Fällen wegen ihrer besonderen geruchlichen Eigenschaften tolerabel erscheint (siehe auch oben):

Amylzimtaldehyd, Amylzimtalkohol, Anisalkohol, Benzaldehyd, Benzylalkohol, Benzylbenzoat, Benzylcinnamat, Benzylsalicylat, Citral, Citronellol, Cumarin, Eugenol, Farnesol, Geraniol, Hexylzimtaldehyd, Hydroxycitronellal, Isoeugenol, Lilial, Limonen, Linalool, Lyril, Methylheptincarbonat, Methylionon, Methylloctincarbonat, Zimtaldehyd, Zimtalkohol, sowie Naturprodukte wie Etherische Öle oder andere Extrakte, welche diese Verbindungen in einer wirksamen Menge enthalten.

Überraschenderweise sind die Verbindungen 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on und 4,8-Dimethylnonan-2-on sowie Mischungen dieser Verbindungen in der Lage, die geruchlichen Eigenschaften einer Mischung der sonstigen Bestandteile der Parfümkomposition dahingehend zu modifizieren, dass die Komposition vor allem im Angeruch mehr Fülle erhält, wobei die rosenartige Natürlichkeit und die frisch-blumige Note deutlich verstärkt werden. Durch ihren weichen rosigeranienartigen Charakter werden die Mischungen deutlich harmonisiert, wobei vor allem frisch-grüne Kopfnote ästhetisch in die Komposition eingebunden werden. Die zwar nicht im Vordergrund stehenden aber dennoch wichtigen leicht citrusartigen etwas an Citrone erinnernden Duftaspekte von 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on und 4,8-Dimethylnonan-2-on führen überdies dazu, dass der Duftcharakter vieler Kompositionen aufgehellt wird und dadurch spritziger und lebendiger wirkt.

Der Anteil an 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on, 4,8-Dimethylnonan-2-on oder deren Mischungen in einer Parfümkomposition kann in weiten Bereichen variiert werden. Üblicherweise liegt der Anteil im Bereich von 0,1 – 90 Gew.-%, vorteilhafterweise jedoch im Bereich von 0,5 – 70 Gew.-%, jeweils bezogen auf die Gesamtmasse der Parfümkomposition.

Die vorliegende Erfindung betrifft auch ein parfümiertes Produkt, welches eine erfindungsgemäße Parfümkomposition umfasst.

Schließlich betrifft die Erfindung auch ein Verfahren zum Erzeugen eines oder Verstärken des Rosengeruchs einer Parfümkomposition oder eines parfümierten Produkts, wobei der Rosengeruch nicht durch eine Kokosnuss-Geruchsnote begleitet ist. In dem Verfahren wird eine sensorisch wirksame Menge von 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on, 4,8-Dimethylnonan-2-on oder einer Mischung dieser Verbindungen mit den sonstigen Bestandteilen der Parfümkomposition vermischt bzw. zu dem Produkt hinzugegeben.

Bevorzugte Ausführungsbeispiele für die erfindungsgemäßen Verwendungen, Parfümkompositionen, parfümierten Produkte und Verfahren ergeben sich aus den nachfolgenden Ausführungen, den Beispielen sowie den beigefügten Patentansprüchen. Es versteht sich, dass bevorzugte Ausgestaltungen, welche für die erfindungsgemäße Parfümkomposition genannt wurden, entsprechend auch für erfindungsgemäße parfümierte Produkte sowie erfindungsgemäße Verwendungen und Verfahren zutreffen.

Die Herstellung der Verbindungen 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on und 4,8-Dimethylnonan-2-on kann über eine selektive Hydrierung von 4,8-Dimethyl-3,7-nonandien-2-on erreicht werden. Durch geeignete Wahl der Hydrierbedingungen gelingt es dabei, selektiv zunächst das 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on und dann durch weitere Hydrierung das 4,8-Dimethylnonan-2-on herzustellen. Das als Ausgangsmaterial eingesetzte 4,8-Dimethyl-3,7-nonandien-2-on ist nach den Vorschriften herstellbar, die beispielsweise in der DE 2256347 C3 und der DE 19961030 A1 angegeben sind.

Geeignete Hydrierkatalysatoren für die selektive Hydrierung sind z. B. Raney-Nickel und Palladium auf Kohle. Das Verhältnis von Katalysator zu Substrat wird hierbei vorteilhafterweise zwischen 0,005:1 und 0,1:1 liegen, bevorzugt ist ein Verhältnis im Bereich von 0,01:1 und 0,0: 1. Die Temperatur bei der Hydrierung liegt vorzugsweise im Bereich zwischen 0 und 50 °C, bevorzugt ist ein Bereich von 20 – 40 °C. Der Wasserstoffdruck bei der selektiven Hydrierung liegt vorteilhafterweise zwischen 1 und 150 bar; bevorzugt ist ein Bereich zwischen 1 und 40 bar. Die Hydrierung kann in Substanz oder in Gegenwart eines geeigneten Lösungsmittels durchgeführt werden.

Die Ketone 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on, 4,8-Dimethylnonan-2-on eignen sich wegen ihrer genannten sensorischen Eigenschaften vorzüglich für den Einsatz in Parfümkompositionen. Wie erwähnt können sie dabei als Einzelstoffe oder miteinander kombiniert in einer Vielzahl von Produkten verwendet werden. Besonders vorteilhaft ist es, sie mit anderen Riechstoffen in verschiedenen, unterschiedlichen Mengenverhältnissen zu neuartigen Parfümkompositionen zu kombinieren.

Bereits in geringen Dosierungen lassen sich mit den Verbindungen 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on und 4,8-Dimethylnonan-2-on Effekte einer deutlichen Natürlichkeit erzielen, wobei der geruchliche Gesamteindruck insgesamt verstärkt und harmonisiert und die Ausstrahlung und Diffusivität wahrnehmbar erhöht werden. Insbesondere überraschend ist hierbei, dass die Verbindungen einerseits verstärkend in Richtung frisch/strahlender wirken, andererseits aber auch harmonisierend wirken.

Weiter oben wurden bereits Beispiele für bevorzugte Riechstoffe genannt, mit denen die Verbindungen 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on und 4,8-Dimethylnonan-2-on kombiniert werden können. Weitere Riechstoffe, die zur Kombination ganz generell geeignet sind, finden sich z. B. in S. Arctander, Perfume and Flavor Materials, Vol. I und II, Montclair, N.J., 1969, Selbstverlag oder K. Bauer, D. Garbe und H. Surburg, Common Fragrance and Flavor Materials, 4th Ed., Wiley-VCH, Weinheim 2001. Im Einzelnen seien genannt:

Extrakte aus natürlichen Rohstoffen wie Etherische Öle, Concretes, Absolues, Resine, Resinoide, Balsame, Tinkturen wie z. B.

Ambratinktur; Amyrisöl; Angelicasamenöl; Angelicawurzelöl; Anisöl; Baldrianöl; Basilikumöl; Baummoos -Absolue; Bayöl; Beifußöl; Benzoeresin; Bergamotteöl; Bienenwachs-Absolue; Birkenteeröl; Bittermandelöl; Bohnenkrautöl; 5 Buccoblätteröl; Cabreuvaöl; Cadeöl; Calmusöl; Campheröl; Canangaöl; Cardamomenöl; Cascarillaöl; Cassiaöl; Cassie-Absolue; Castoreum-absolue; Cedernblätteröl; Cedernholzöl; Cistusöl; Citronellöl; Citronenöl; Copaivabalsam; Copaivabalsamöl; Corianderöl; Costuswurzelöl; Cuminöl; Cypressenöl; Davanaöl; 10 Dillkrautöl; Dillsamenöl; Eau de brouts-Absolue; Eichenmoos-Absolue; Elemiöl; Estragonöl; Eucalyptus-citriodora-Öl; Eucalyptusöl; Fenchelöl; Fichtennadelöl; Galbanumöl; Galbanumresin; Geraniumöl; Grapefruitöl; Guajakholzöl; Gurjunbalsam; Gurjunbalsamöl; Helichrysum-Absolue; Helichrysumöl; Ingweröl; Iriswurzel-Absolue; Iriswurzelöl; Jasmin-Absolue; Kalmusöl; Kamillenöl blau; Kamillenöl römisch; Karottensamenöl; Kaskarillaöl; Kiefernadelöl; 15 Krauseminzöl; Kümmelöl; Labdanumöl; Labdanum-Absolue; Labdanumresin; Lavandin-Absolue; Lavandinöl; Lavendel-Absolue; Lavendelöl; Lemongrasöl; Liebstocköl; Limetteöl destilliert; Limetteöl gepreßt; Linaloeöl; Litsea-cubeba-Öl; Lorbeerblätteröl; Macisöl; Majoranöl; Mandarinenöl; Massoirindenöl; Mimosa-Absolue; Moschuskörneröl; Moschustinktur; Muskateller-Salbei-Öl; 20 Muskatnußöl; Myrrhen-Absolue; Myrrhenöl; Myrtenöl; Nelkenblätteröl; Nelkenblütenöl; Neroliöl; Olibanum-Absolue; Olibanumöl; Opopanaxöl; Orangenblüten-Absolue; Orangenöl; Origanumöl; Palmarosaöl; Patchouliöl; Perillaöl; Perubalsamöl; Petersilienblätteröl; Petersiliensamenöl; Petitgrainöl; Pfefferminzöl; Pfefferöl; Pimentöl; Pineöl; Poleyöl; Rosen-Absolue; Rosenholzöl; Rosenöl; 25 Rosmarinöl; Salbeiöl dalmatinisch; Salbeiöl spanisch; Sandelholzöl; Selleriesamenöl; Spiklavendelöl; Sternanisöl; Styraxöl; Tagetesöl; Tannennadelöl; Tea-tree-Öl; Terpentinöl; Thymianöl; Tolubalsam; Tonka-Absolue; Tuberosen-Absolue; Vanilleextrakt; Veilchenblätter-Absolue; Verbenaöl; Vetiveröl; Wacholderbeeröl; Weinhefenöl; Wermutöl; Wintergrünöl; Ylangöl; Ysopöl; Zibet-Absolue; Zimtblätteröl; Zimtrindenöl sowie Fraktionen davon, bzw. daraus isolierten Inhaltsstoffen; 30

Soweit die genannten Substanzen Verbindungen mit sensibilisierenden/allergenisierenden Eigenschaften umfassen, gelten die obigen Anmerkungen entsprechend.

Einzel-Riechstoffe aus den Gruppen der Kohlenwasserstoffe, wie z. B. 3-Caren; α -Pinen; β -Pinen; α -Terpinen; γ -Terpinen; p-Cymol; Bisabolen; Camphen; Caryophyllen; Cedren; Farnesen; Limonen; Longifolen; Myrcen; Ocimen; Valencen; (E,Z)-1,3,5-Undecatrien; Styrol; Diphenylmethan;

der aliphatischen Alkohole wie z. B. Hexanol; Octanol; 3-Octanol; 2,6-Dimethylheptanol; 2-Methyl-2-heptanol; 2-Methyl-2-octanol; (E)-2-Hexenol; (E)- und (Z)-3-Hexenol; 1-Octen-3-ol; Gemisch von 3,4,5,6,6-Pentamethyl-3/4-hepten-2-ol und 3,5,6,6-Tetramethyl-4-methyleneheptan-2-ol; (E,Z)-2,6-Nonadienol; 3,7-Dimethyl-7-methoxyoctan-2-ol; 9-Decenol; 10-Undecenol; 4-Methyl-3-decen-5-ol;

der aliphatischen Aldehyde und deren Acetale wie z. B. Hexanal; Heptanal; Octanal; Nonanal; Decanal; Undecanal; Dodecanal; Tridecanal; 2-Methyloctanal; 2-Methylnonanal; (E)-2-Hexenal; (Z)-4-Heptenal; 2,6-Dimethyl-5-heptenal; 10-Undecenal; (E)-4-Decenal; 2-Dodecenal; 2,6,10-Trimethyl-9-undecenal; 2,6,10-Trimethyl-5,9-undecadienal; Heptanaldiethylacetal; 1,1-Dimethoxy-2,2,5-trimethyl-4-hexen; Citronellyloxyacetaldehyd; 1-(1-Methoxypropoxy)-(E/Z)-3-hexen;

der aliphatischen Ketone und deren Oxime wie z. B. 2-Heptanon; 2-Octanon; 3-Octanon; 2-Nonanon; 5-Methyl-3-heptanon; 5-Methyl-3-heptanonoxim; 2,4,4,7-Tetramethyl-6-octen-3-on; 6-Methyl-5-hepten-2-on;

der aliphatischen schwefelhaltigen Verbindungen wie z. B. 3-Methylthiohexanol; 3-Methylthiohexylacetat; 3-Mercaptohexanol; 3-Mercaptohexylacetat; 3-Mercaptohexylbutyrat; 3-Acetylthiohexylacetat; 1-Menthen-8-thiol;

der aliphatischen Nitrile wie z.B. 2-Nonensäurenitril; 2-Undecensäurenitril; 2-Tridecensäurenitril; 3,12-Tridecadiensäurenitril; 3,7-Dimethyl-2,6-octadiensäurenitril; 3,7-Dimethyl-6-octensäurenitril;

der Ester von aliphatischen Carbonsäuren wie z.B. (E)- und (Z)-3-Hexenylformiat; Ethylacetoacetat; Isoamylacetat; Hexylacetat; 3,5,5-Trimethylhexylacetat; 3-Methyl-2-butenylacetat; (E)-2-Hexenylacetat; (E)- und (Z)-3-Hexenylacetat; Octylacetat; 3-Octylacetat; 1-Octen-3-ylacetat; Ethylbutyrat; Butylbutyrat; ; Isoamylbutyrat; Hexylbutyrat; (E)- und (Z)-3-Hexenylisobutyrat; Hexylcrotonat; Ethylisovalerianat; Ethyl-2-methylpentanoat; Ethylhexanoat; Allylhexanoat; Ethylheptanoat; Allylheptanoat; Ethyloctanoat; Ethyl-(E,Z)-2,4-decadienoat; Methyl-2-octinat; Methyl-2-noninat; Allyl-2-isoamyoxyacetat; Methyl-3,7-dimethyl-2,6-octadienoat; 4-Methyl-2-pentylcrotonat;

der acyclischen Terpenalkohole wie z. B. Citronellol; Geraniol; Nerol; Linalool; Lavadulol; Nerolidol; Farnesol; Tetrahydrolinalool; Tetrahydrogeraniol; 2,6-Dimethyl-7-octen-2-ol; 2,6-Dimethyloctan-2-ol; 2-Methyl-6-methylen-7-octen-2-ol; 2,6-Dimethyl-5,7-octadien-2-ol; 2,6-Dimethyl-3,5-octadien-2-ol; 3,7-Dimethyl-4,6-octadien-3-ol; 3,7-Dimethyl-1,5,7-octatrien-3-ol 2,6-Dimethyl-2,5,7-octatrien-1-ol; sowie deren Formiate, Acetate, Propionate, Isobutyrate, Butyrate, Isovalerianate, Pentanoate, Hexanoate, Crotonate, Tiglinate, 3-Methyl-2-butenate;

der acyclischen Terpenaldehyde und -ketone wie z. B. Geranial; Neral; Citronellal; 7-Hydroxy-3,7-dimethyloctanal; 7-Methoxy-3,7-dimethyloctanal; 2,6,10-Trimethyl-9-undecenal; Geranylacetone; sowie die Dimethyl- und Diethylacetale von Geranial, Neral, 7-Hydroxy-3,7-dimethyloctanal;

der cyclischen Terpenalkohole wie z. B. Menthol; Isopulegol; alpha-Terpineol; Terpinenol-4; Menthan-8-ol; Menthan-1-ol; Menthan-7-ol; Borneol; Isoborneol; Linalooloxid; Nopol; Cedrol; Ambrinol; Vetiverol; Guajol; sowie deren Formiate, Acetate, Propionate, Isobutyrate, Butyrate, Isovalerianate, Pentanoate, Hexanoate, Crotonate, Tiglinate, 3-Methyl-2-butenate;

der cyclischen Terpenaldehyde und -ketone wie z. B. Menthon; Isomenthon ;
8-Mercaptomenthan-3-on ; Carvon; Campher; Fenchon; alpha-Ionon; beta-
Ionon; alpha-n-Methylionon; beta-n-Methylionon; alpha-Isomethylionon; beta-
Isomethylionon; alpha-Iron; alpha-Damascon; beta-Damascon; beta-
5 Damascenon; delta-Damascon; gamma-Damascon; 1-(2,4,4-Trimethyl-2-
cyclohexen-1-yl)-2-buten-1-on ; 1,3,4,6,7,8a-Hexahydro-1,1,5,5-tetramethyl-
2H-2,4a-methanonaphthalen-8(5H)-on; 2-Methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-
cyclohexen-1-yl)-2-butenal; Nootkaton ; Dihydronootkaton ; 4,6,8-
Megastigmatrien-3-on; alpha-Sinensal ; beta-Sinensal ; Acetyliertes Cedern-
10 holzöl (Methylcedrylketon);

der cyclischen Alkohole wie z.B. 4-tert.-Butylcyclohexanol ; 3,3,5-
Trimethylcyclohexanol; 3-Isocamphylcyclohexanol; 2,6,9-Trimethyl-2,2,5,9-
cyclododecatrien-1-ol; 2-Isobutyl-4-methyltetrahydro-2H-pyran-4-ol;

der cycloaliphatischen Alkohole wie z.B. alpha,3,3-
15 Trimethylcyclohexylmethanol; 1-(4-Isopropylcyclohexyl)ethanol; 2-Methyl-4-
(2,2,3-trimethyl-3-cyclopent-1-yl)butanol; 2-Methyl-4-(2,2,3-trimethyl-3-
cyclopent-1-yl)-2-buten-1-ol; 2-Ethyl-4-(2,2,3-trimethyl-3-cyclopent-1-yl)-2-
buten-1-ol; 3-Methyl-5-(2,2,3-trimethyl-3-cyclopent-1-yl)-pentan-2-ol; 3-Methyl-
5-(2,2,3-trimethyl-3-cyclopent-1-yl)-4-penten-2-ol; 3,3-Dimethyl-5-(2,2,3-
20 trimethyl-3-cyclopent-1-yl)-4-penten-2-ol; 1-(2,2,6-Trimethylcyclohexyl)pentan-
3-ol; 1-(2,2,6-Trimethylcyclohexyl)hexan-3-ol;

der cyclischen und cycloaliphatischen Ether wie z.B. Cineol; Cedrylmethyl-
ether; Cyclododecylmethylether; 1,1-Dimethoxycyclododecan; (Ethoxymetho-
xy)cyclododecan; alpha-Cedrenepoxid; 3a,6,6,9a-
25 Tetramethyldodecahydronaphtho[2,1-b]furan; 3a-Ethyl-6,6,9a-
trimethyldodecahydronaphtho[2,1-b]furan; 1,5,9-Trimethyl-13-
oxabicyclo[10.1.0]trideca-4,8-dien; Rosenoxid; 2-(2,4-Dimethyl-3-cyclohexen-
1-yl)-5-methyl-5-(1-methylpropyl)-1,3-dioxan;

der cyclischen und makrocyclischen Ketone wie z.B. 4-tert.-
30 Butylcyclohexanon; 2,2,5-Trimethyl-5-pentylcyclopentanon*; 2-

Heptylcyclopentanon*; 2-Pentylcyclopentanon*; 2-Hydroxy-3-methyl-2-cyclopenten-1-on; 3-Methyl-cis-2-penten-1-yl-2-cyclopenten-1-on; 3-Methyl-2-pentyl-2-cyclopenten-1-on; 3-Methyl-4-cyclopentadecenon; 3-Methyl-5-cyclopentadecenon; 3-Methylcyclopentadecanon; 4-(1-Ethoxyvinyl)-3,3,5,5-tetramethylcyclohexanon; 4-tert.-Pentylcyclohexanon; 5-Cyclohexadecen-1-on; 6,7-Dihydro-1,1,2,3,3-pentamethyl-4(5H)-indanon; 8-Cyclohexadecen-1-on; 9-Cycloheptadecen-1-on; Cyclopentadecanon; Cyclohexadecanon;

der cycloaliphatischen Aldehyde wie z.B. 2,4-Dimethyl-3-cyclohexencarbaldehyd; 2-Methyl-4-(2,2,6-trimethyl-cyclohexen-1-yl)-2-butenal; 4-(4-Hydroxy-4-methylpentyl)-3-cyclohexencarbaldehyd; 4-(4-Methyl-3-penten-1-yl)-3-cyclohexencarbaldehyd;

der cycloaliphatischen Ketone wie z. B. 1-(3,3-Dimethylcyclohexyl)-4-penten-1-on; 2,2-Dimethyl-1-(2,4-dimethyl-3-cyclohexen-1-yl)-1-propanon; 1-(5,5-Dimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-4-penten-1-on; 2,3,8,8-Tetramethyl-1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-2-naphtalenylmethylketon; Methyl-2,6,10-trimethyl-2,5,9-cyclododecatrienylketon; tert.-Butyl-(2,4-dimethyl-3-cyclohexen-1-yl)keton;

der Ester cyclischer Alkohole wie z.B. 2-tert-Butylcyclohexylacetat; 4-tert-Butylcyclohexylacetat; 2-tert-Pentylcyclohexylacetat; 4-tert-Pentylcyclohexylacetat; 3,3,5-Trimethylcyclohexylacetat; Decahydro-2-naphthylacetat; 2-Cyclopentylcyclopentylcrotonat; 3-Pentyltetrahydro-2H-pyran-4-ylacetat; Decahydro-2,5,5,8a-tetramethyl-2-naphthylacetat; 4,7-Methano-3a,4,5,6,7,7a-hexahydro-5, bzw. 6-indenylacetat; 4,7-Methano-3a,4,5,6,7,7a-hexahydro-5, bzw. 6-indenylpropionat; 4,7-Methano-3a,4,5,6,7,7a-hexahydro-5, bzw. 6-indenylisobutytrat; 4,7-Methanoctahydro-5, bzw. 6-indenylacetat;

der Ester cycloaliphatischer Alkohole wie z.B. 1-Cyclohexylethylcrotonat

der Ester cycloaliphatischer Carbonsäuren wie z. B. Allyl-3-cyclohexylpropionat; Allylcyclohexyloxyacetat; cis- und trans-Methyldihydrojasmonat; cis- und trans-Methyljasmonat; Methyl-2-hexyl-3-

oxocyclopentancarboxylat; Ethyl-2-ethyl-6,6-dimethyl-2-cyclohexencarboxylat;
Ethyl-2,3,6,6-tetramethyl-2-cyclohexencarboxylat; Ethyl-2-methyl-1,3-dioxolan-
2-acetat;

der araliphatischen Alkohole wie z.B. Benzylalkohol; 1-Phenylethylalkohol; 2-
5 Phenylethylalkohol; 3-Phenylpropanol; 2-Phenylpropanol; 2-Phenoxyethanol;
2,2-Dimethyl-3-phenylpropanol; 2,2-Dimethyl-3-(3-methylphenyl)propanol; 1,1-
Dimethyl-2-phenylethylalkohol; 1,1-Dimethyl-3-phenylpropanol; 1-Ethyl-1-
methyl-3-phenylpropanol; 2-Methyl-5-phenylpentanol; 3-Methyl-5-
phenylpentanol; 3-Phenyl-2-propen-1-ol; 4-Methoxybenzylalkohol; 1-(4-
10 Isopropylphenyl)ethanol;

der Ester von araliphatischen Alkoholen und aliphatischen Carbonsäuren wie
z.B. Benzylacetat; Benzylpropionat; Benzylisobutyrat; Benzylisovalerianat; 2-
Phenylethylacetat; 2-Phenylethylpropionat; 2-Phenylethylisobutyrat; 2-
Phenylethylisovalerianat; 1-Phenylethylacetat; alpha-
15 Trichlormethylbenzylacetat; alpha,alpha-Dimethylphenylethylacetat; al-
pha,alpha-Dimethylphenylethylbutyrat; Cinnamylacetat; 2-
Phenoxyethylisobutyrat; 4-Methoxybenzylacetat;

der araliphatischen Ether wie z.B. 2-Phenylethylmethylether; 2-
Phenylethylisoamylether; 2-Phenylethyl-1-ethoxyethylether; Phenylacetalde-
20 hyddimethylacetal; Phenylacetaldehyddiethylacetal; Hydratropaaldehyddi-
methylacetal; Phenylacetaldehydglycerinacetal; 2,4,6-Trimethyl-4-phenyl-1,3-
dioxan; 4,4a,5,9b-Tetrahydroindeno[1,2-d]-m-dioxin; 4,4a,5,9b-Tetrahydro-2,4-
dimethylindeno[1,2-d]-m-dioxin;

der aromatischen und araliphatischen Aldehyde wie z. B. Benzaldehyd; Phe-
25 nylacetaldehyd; 3-Phenylpropanal; Hydratropaaldehyd; 4-Methylbenzaldehyd;
4-Methylphenylacetaldehyd; 3-(4-Ethylphenyl)-2,2-dimethylpropanal; 2-Methyl-
3-(4-isopropylphenyl)propanal; 2-Methyl-3-(4-tert.-butylphenyl)propanal; 2-
Methyl-3-(4-isobutylphenyl)propanal; 3-(4-tert.-Butylphenyl)propanal; Zimtal-
dehyd; alpha-Butylzimtaldehyd; alpha-Amylzimtaldehyd; alpha-
30 Hexylzimtaldehyd; 3-Methyl-5-phenylpentanal; 4-Methoxybenzaldehyd; 4-

Hydroxy-3-methoxybenzaldehyd; 4-Hydroxy-3-ethoxybenzaldehyd; 3,4-Methylendioxybenzaldehyd; 3,4-Dimethoxybenzaldehyd; 2-Methyl-3-(4-methoxyphenyl)propanal; 2-Methyl-3-(4-methylendioxyphenyl)propanal;

der aromatischen und araliphatischen Ketone wie z.B. Acetophenon; 4-Methylacetophenon; 4-Methoxyacetophenon; 4-tert.-Butyl-2,6-dimethylacetophenon; 4-Phenyl-2-butanon; 4-(4-Hydroxyphenyl)-2-butanon; 1-(2-Naphthalenyl)ethanon; 2-Benzofuranylethanon; 3-Methyl-2-benzofuranylethanon; Benzophenon; 1,1,2,3,3,6-Hexamethyl-5-indanylmethylketon; 6-tert.-Butyl-1,1-dimethyl-4-indanylmethylketon; 1-[2,3-dihydro-1,1,2,6-tetramethyl-3-(1-methylethyl)-1H-5-indenyl]ethanon; 5',6',7',8'-Tetrahydro-3',5',5',6',8',8'-hexamethyl-2-acetonaphthon;

der aromatischen und araliphatischen Carbonsäuren und deren Ester wie z.B. Benzoesäure; Phenylessigsäure; Methylbenzoat; Ethylbenzoat; Hexylbenzoat; Benzylbenzoat; Methylphenylacetat; Ethylphenylacetat; Geranylphenylacetat; Phenylethyl-phenylacetat; Methylcinnamat; Ethylcinnamat; Benzylcinnamat; Phenylethylcinnamat; Cinnamylcinnamat; Allylphenoxyacetat; Methylsalicylat; Isoamylsalicylat; Hexylsalicylat; Cyclohexylsalicylat; cis-3-Hexenylsalicylat; Benzylsalicylat; Phenylethylsalicylat; Methyl-2,4-dihydroxy-3,6-dimethylbenzoat; Ethyl-3-phenylglycidat; Ethyl-3-methyl-3-phenylglycidat;

der stickstoffhaltigen aromatischen Verbindungen wie z.B. 2,4,6-Trinitro-1,3-dimethyl-5-tert.-butylbenzol; 3,5-Dinitro-2,6-dimethyl-4-tert.-butylacetophenon; Zimtsäurenitril; 3-Methyl-5-phenyl-2-pentensäurenitril; 3-Methyl-5-phenylpentensäurenitril; Methylantranilat; Methy-N-methylantranilat; Schiff'sche Basen von Methylantranilat mit 7-Hydroxy-3,7-dimethyloctanal, 2-Methyl-3-(4-tert.-butylphenyl)propanal oder 2,4-Dimethyl-3-cyclohexencarbaldehyd; 6-Isopropylchinolin; 6-Isobutylchinolin; 6-sec.-Butylchinolin; 2-(3-Phenylpropyl)pyridin; Indol; Skatol; 2-Methoxy-3-isopropylpyrazin; 2-Isobutyl-3-methoxypyrazin;

der Phenole, Phenylether und Phenylester wie z.B. Estragol; Anethol; Eugenol; Eugenylmethylether; Isoeugenol; Isoeugenylmethylether; Thymol; Carvac-

rol; Diphenylether; beta-Naphthylmethylether; beta-Naphthylethylether; beta-Naphthylisobutylether; 1,4-Dimethoxybenzol; Eugenylacetat; 2-Methoxy-4-methylphenol; 2-Ethoxy-5-(1-propenyl)phenol; p-Kresylphenylacetat;

der heterocyclischen Verbindungen wie z.B. 2,5-Dimethyl-4-hydroxy-2H-furan-3-on; 2-Ethyl-4-hydroxy-5-methyl-2H-furan-3-on; 3-Hydroxy-2-methyl-4H-pyran-4-on; 2-Ethyl-3-hydroxy-4H-pyran-4-on;

der Lactone wie z.B. 1,4-Octanolid; 3-Methyl-1,4-octanolid; 1,4-Nonanolid; 1,4-Decanolid; 8-Decen-1,4-olid; 1,4-Undecanolid; 1,4-Dodecanolid; 1,5-Decanolid; 1,5-Dodecanolid; 4-Methyl-1,4-decanolid; 1,15-Pentadecanolid; cis- und trans-11-Pentadecen-1,15-olid; cis- und trans-12-Pentadecen-1,15-olid; 1,16-Hexadecanolid; 9-Hexadecen-1,16-olid; 10-Oxa-1,16-hexadecanolid; 11-Oxa-1,16-hexadecanolid; 12-Oxa-1,16-hexadecanolid; Ethylen-1,12-dodecandioat; Ethylen-1,13-tridecandioat; Cumarin; 2,3-Dihydrocumarin*; Octahydrocumarin*.

Anmerkung: Die in der vorstehenden Aufzählung durch ein * markierten Substanzen besitzen einen Kokosgeruch und werden daher nur in besonderen Fällen in Kombination mit 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on oder 4,8-Dimethylnonan-2-on eingesetzt. Unterstrichen sind wieder Verbindungen, die sensibilisierende/allergenisierende Wirkung haben und deren Verwendung daher nur in besonderen Fällen vorteilhaft ist.

Welche Kombinationen bevorzugt und welche weniger vorteilhaft sind, ergibt sich insbesondere aus den Bemerkungen weiter oben. Die Kombination mit Rosenriechstoffen ist danach besonders bevorzugt, die Kombination mit allergenen Riechstoffen hingegen wenig vorteilhaft (auch wenn diese selbst Rosenriechstoffe sind, wie z. B. Citronellol und Geraniol).

In Parfümkompositionen beträgt die eingesetzte Menge der beiden erfindungsgemäßen Ketone 0,01 bis 99,9 Gew.-%, vorzugsweise 0,1 bis 90 % und besonders bevorzugt 0,5 bis 70 %, jeweils bezogen auf die gesamte Parfümöl-Komposition.

Parfümöle, die 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on und 4,8-Dimethylnonan-2-on enthalten, können in flüssiger Form, unverdünnt oder mit einem Lösungsmittel verdünnt für Parfümierungen eingesetzt werden. Geeignete Lösungsmittel hierfür sind z.B. Ethanol, Isopropanol, Diethylenglycolmonoethylether, Glycerin, Propylenglycol, 1,2-Butylenglycol, Dipropylenglycol, Diethylphthalat, Triethylcitrat, Isopropylmyristat usw.

Des weiteren können Parfümöle, die die beiden erfindungsgemäßen Ketone enthalten, an einem Trägerstoff adsorbiert sein, der sowohl für eine feine Verteilung der Riechstoffe im Produkt als auch für eine kontrollierte Freisetzung bei der Anwendung sorgt. Derartige Träger können poröse anorganische Materialien wie Leichtsulfat, Kieselgele, Zeolithe, Gipse, Tone, Tongranulate, Gasbeton usw. oder organische Materialien wie Hölzer, Cellulose-basierende Stoffe, Zucker oder Kunststoffe wie PVC, Polyvinylacetate oder Polyurethane sein.

Parfümöle, die die beiden erfindungsgemäßen Ketone enthalten, können auch mikroverkapselt, sprühgetrocknet, als Einschluß-Komplexe oder als Extrusions-Produkte vorliegen und in dieser Form dem zu parfümierenden Produkt hinzugefügt werden.

Gegebenenfalls können die Eigenschaften der derart modifizierten Parfümöle durch sog. „Coaten“ mit geeigneten Materialien im Hinblick auf eine gezieltere Duftfreisetzung weiter optimiert werden, wozu vorzugsweise wachsartige Kunststoffe wie z.B. Polyvinylalkohol verwendet werden.

Die Mikroverkapselung der Parfümöle kann beispielsweise durch das sogenannte Koazervationsverfahren mit Hilfe von Kapselmaterialien z.B. aus polyurethan-artigen Stoffen oder Weichgelatine, erfolgen. Die sprühgetrockneten Parfümöle können beispielsweise durch Sprühtrocknung einer das Parfümöle enthaltenden Emulsion, bzw. Dispersion hergestellt werden, wobei als Trägerstoffe modifizierte Stärken, Proteine, Dextrin und pflanzliche Gummen verwendet werden können. Einschluß-Komplexe können z.B. durch Eintragen von Dispersionen von dem Parfümöle und Cyclodextrinen oder Harnstoffderivaten in ein geeignetes Lösungsmittel, z.B. Wasser, hergestellt werden. Extrusi-

ons-Produkte können durch Verschmelzen der Parfümöle mit einem geeigneten wachsartigen Stoff und durch Extrusion mit nachfolgender Erstarrung, ggf. in einem geeigneten Lösungsmittel, z.B. Isopropanol, erhalten werden.

Parfümöle, die die beiden erfindungsgemäßen Ketone enthalten, können in konzentrierter Form, in Lösungen oder in oben beschriebener modifizierter Form verwendet werden für die Herstellung von z.B. Parfüm-Extraits, Eau de Parfums, Eau de Toilettes, Rasierwässer, Eau de Colognes, Pre-shave-Produkte, Splash-Colognes und parfümierten Erfrischungstüchern sowie die Parfümierung von sauren, alkalischen und neutralen Reinigungsmitteln, wie z.B. Fußbodenreinigern, Fensterglasreinigern, Geschirrspülmittel, Bad- und Sanitärreinigern, Scheuermilch, festen und flüssigen WC-Reinigern, pulver- und schaumförmigen Teppichreinigern, Textilerfrischern, Bügelhilfen, flüssigen Waschmitteln, pulverförmigen Waschmitteln, Wäschevorbehandlungsmitteln wie Bleichmittel, Einweichmittel und Fleckenentfernern, Wäscheweichspülern, Waschseifen, Waschtabletten, Desinfektionsmitteln, Oberflächendesinfektionsmitteln sowie von Luftverbesserern in flüssiger, gelartiger oder auf einem festen Träger aufgebracht Form, Aerosolsprays, Wachsen und Polituren wie Möbelpolituren, Fußbodenwachsen, Schuhcremes sowie Körperpflegemitteln wie z.B. festen und flüssigen Seifen, Duschgelen, Shampoos, Rasierseifen, Rasierschäumen, Badeölen, kosmetischen Emulsionen vom Öl-in-Wasser-, vom Wasser-in-Öl- und vom Wasser-in-Öl-in-Wasser-Typ wie z.B. Hautcremes- und -lotionen, Gesichtscresmes und -lotionen, Sonnenschutzcremes- und -lotionen, After-sun-cremes und -lotionen, Handcremes und -lotionen, Fußcremes und -lotionen, Enthaarungscremes und -lotionen, After-shave-Cremes und -lotionen, Bräunungscremes und -lotionen, Haarpflegeprodukten wie z.B. Haarsprays, Haargelen, festigenden Haarlotionen, Haarspülungen, permanenten und semipermanenten Haarfärbemitteln, Haarverformungsmitteln wie Kaltwellen und Haarglättungsmitteln, Haarwässern, Haarcremes und -lotionen, Deodorantien und Antiperspirantien wie z.B. Achselsprays, Roll-ons, Deosticks, Deocremes, Produkten der dekorativen Kosmetik wie z.B. Lidschatten, Nagellacke, Make-ups, Lippenstifte, Mascara sowie von Kerzen, Lampenölen, Räucherstäbchen, Insektiziden, Repellentien und Treibstoffen.

Nachfolgend wird die Erfindung anhand von Beispielen näher erläutert:

Beispiel 1: Herstellung von 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on durch Hydrierung von 4,8-Dimethyl-3,7-nonadien-2-on

116,2 g 4,8-Dimethyl-3,7-nonadien-2-on (vgl. DE 2256347 C3, DE 19961030
5 A1) werden in 150 ml Essigester gelöst und in Gegenwart von 7 g Raney-Nickel in einem 1l-Stahlautoklaven bei einer Temperatur von 30 bis 35°C und einem Wasserstoffdruck von 30 bar hydriert. Nach Aufnahme von ca. 1,2 Moläquivalenten Wasserstoff ist sämtliches 4,8-Dimethyl-3,7-nonadien-2-on umgesetzt. Die Hydrierung wird abgebrochen, der Katalysator abfiltriert, das Lösungsmittel abdestilliert und aus dem erhaltenen Rohprodukt das 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on durch Fraktionierung in einer Spaltrohr®-Kolonne (Hersteller: Fischer Labor- und Verfahrenstechnik GmbH) in reiner Form isoliert. Ausbeute 90 g (77% d. Th.), Sdp. 63°C bei 0,2 mbar.

Geruch: Strahlend rosig, natürlich, nach Teerosen, citronellolig, geraniumartig

15 Beispiel 2: Herstellung von 4,8-Dimethylnonan-2-on durch Hydrierung von 4,8-Dimethyl-3,7-nonadien-2-on

In einem wie unter Beispiel 1 beschriebenen Reaktionsansatz wurde die Hydrierung bei einem Druck von 50 bar solange weitergeführt, bis 2 Moläquivalente Wasserstoff aufgenommen waren. Nach der Aufarbeitung wurde aus dem
20 Rohprodukt reines 4,8-Dimethylnonan-2-on durch Fraktionierung in einer Spaltrohr®-Kolonne in reiner Form erhalten. Ausbeute 107 g (90 % d. Th.), Sdp. 58°C bei 0,4 mbar.

Geruch: frisch, rosig, etwas citrisch-citronig, citronellolig

Beispiel 3: Herstellung eines Parfüms mit einem rosenartigen Duft unter Verwendung von 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on und 4,8-Dimethylnonan-2-on:
25

Es werden zunächst vermischt:

	<u>Riechstoff</u>	<u>Gewichtsteile</u>
	10-Undecenal	2
	Datilat H&R (1-Cyclohexylethylcrotonat)	15
5	9-Decenol	1
	Eugenol	5
	Guajakholzöl	7
	Indoflor H&R (2,4-Dimethyl-5,6-indeno-1,3-dioxan)	2
	alpha-Ionon	20
10	beta-Ionon	7
	Cyclohexadecanon	17
	Phenylacetaldehyd 10-proz. in Dipropylenglycol	7
	Pyroprunat H&R (2-Cyclopentylcyclopentylcrotonate)	10
	<u>Rosenoxid 10-proz. in in Dipropylenglycol</u>	<u>7</u>
15		<u>100</u>

20 Durch Hinzufügen von 125 Gewichtsteilen 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on und 125 Gewichtsteilen 4,8-Dimethylnonan-2-on wird ein Parfümöl mit einer frischen, strahlenden und modernen Rosennote erhalten, das sich hervorragend für die Parfümierung von Reinigern, Wäscheweich-Produkten, Waschpulvern, Raumluftverbessern, Seifen, Shampoos, Badezusätzen, Hautcremes, Körperlotionen, Deodorantien und sonstigen Kosmetika eignet.

Beispiel 4: Herstellung eines Parfüms mit einem rosenartigen Duft unter Verwendung von 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on:

25 Es werden vermischt:

<u>Riechstoff</u>	<u>Gewichtsteile</u>
10-Undecenal	2
Datilat H&R (1-Cyclohexylethylcrotonat)	15
9-Decenol	1
5 Eugenol	5
Guajakholzöl	7
Indoflor H&R (2,4-Dimethyl-5,6-indeno-1,3-dioxan)	2
alpha-Ionon	20
beta-Ionon	7
10. Cyclohexadecanon	17
Phenylacetaldehyd 10-proz. in Dipropylenglycol	7
Pyroprunat H&R (2-Cyclopentylcyclopentylcrotonate)	10
<u>Rosenoxid 10-proz. in in Dipropylenglycol</u>	<u>7</u>
	<u>100</u>

15

Durch Hinzufügen von 50 Gewichtsteilen 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on wird ein Parfümöl mit einer ausgesprochen natürlichen Teerosen-artigen Geruchsnote erhalten, das sich ebenfalls hervorragend für die Parfümierung von Reinigern, Wäscheweich-Produkten, Waschpulvern, Raumluftverbessern, Seifen, Shampoos, Badezusätzen, Hautcremes, Körperlotionen, Deodorantien und sonstigen Kosmetika eignet.

20

Ansprüche

1. Verwendung von 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on, 4,8-Dimethylnonan-2-on oder einer Mischung dieser Verbindungen zum Vermitteln eines Rosengeruchs, der nicht von einer Kokosnuß-Geruchsnote begleitet ist.

5 2. Verwendung von 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on, 4,8-Dimethylnonan-2-on oder einer Mischung dieser Verbindungen zur Herstellung einer Parfümkomposition mit einem Rosengeruch, der nicht von einer Kokosnuß-Geruchsnote begleitet ist.

3. Verwendung von 4,8-Dimethylnonan-2-on als Riechstoff.

10 4. Parfümkomposition mit einem Rosengeruch, umfassend

- eine organoleptisch wirksame Menge an 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on, 4,8-Dimethylnonan-2-on oder einer Mischung dieser Verbindungen

sowie

- zumindest einen weiteren Riechstoff.

15 5. Parfümkomposition nach Anspruch 4, wobei der weitere Riechstoff aus der Gruppe ausgewählt ist, die besteht aus:

Geranylformiat; Geranylacetat; Geranylpropionat; Geranylisobutytrat; Geranylbutyrat; Geranylisovalerianat; Geranyltiglinat; Geranylbenzoat; Citronellylformiat; Citronellylacetat; Citronellylpropionat; Citronellylisobutytrat; Citronellylbutyrat; Citronellylisovalerianat; Citronellyltiglinat; Citronellylbenzoat; Phenylethylalkohol; Phenylacetaldehyd; Phenylacetaaldehyddimethylacetal; Phenylethylformiat; Phenylethylacetat; Phenylethylpropionat; Phenylethylisobutytrat; Phenylethylbutyrat; Phenylethylpivalat; Phenylethylisovalerianat; Phenylethyl-2-ethylbutyrat; Phenylethyltiglinat; Phenylethylbenzoat; Phenylethylphenylacetat;

2-Phenoxyethylisobutytrat; Geranylmethylether; Rosenoxid; Phenylethylmethylether; Phenylethylethylether; Phenylethylisoamylether; 2-Methoxybenzylethylether; α -Trichlormethylbenzylacetat; α ,3,3-Trimethylcyclohexanmethylacetat; 2,4,6-Trimethyl-3-cyclohexenmethanol; 5 N,N-Diethyl-2-ethylhexansäureamid; 3,7-Dimethyloctanol; Geranylaceton; Linalool; 3,7-Dimethyl-1,6-nonadien-3-ol; Nerolidol; Farnesol; 9-Decenol; 9-Decenylacetat; Decanal; 10-Undecenol; 10-Undecenol; Citronellyloxyacetaldehyd; 3,7-Dimethyloctanylacetaldehyd; 2-Methyl-5-phenylpentanol; 2-Methyl-5-phenylpentanal; 3-Methyl-5-phenylpentanol; Benzophenon; Diphenyloxid; 10 Diphenylmethan; α -Damascon; β -Damascon; δ -Damascon; γ -Damascon; β -Damascenon; 1-(2,4,4-Trimethyl-2-cyclohexenyl)-2-buten-1-on; Rosenöl; Rosenabsolue; Geraniumöl; Palmarosaöl; Citronenöl; Patchoulyöl; Nelkenöl; Ylang-Ylang-Öl; Jasminabsolue; Kohlensäureethyl-2,3,6-trimethylcyclohexylester; Hexanal; Heptanal; Octanal; Nonanal; Hexanol; Heptanol; 15 Octanol; Nonanol; Decanol; Undecanol; Dodecanol; Hexylacetat; Heptylacetat; Octylacetat; Nonylacetat; Decylacetat; Undecylacetat; Dodecylacetat; Benzylacetat; Benzylbutyrat; Benzylbenzoat; Methylphenylacetat; Ethylphenylacetat; α -Terpineol; 4,4a,5,9b-Tetrahydro-2,4-dimethylindeno[1,2-d]-m-dioxin; 4,4a,5,9b-Tetrahydroindeno[1,2-d]-m-dioxin; Ethyl-2-ethyl-6,6-dimethyl-20 2-cyclohexencarboxylat; Ethyl-2,3,6,6-tetramethyl-2-cyclohexencarboxylat; Ethylsafranat; Methyl-6,6-dimethyl-2-methylencyclohexancarboxylat; Eugenol; Isoeugenol; Lavendelöl; Guajakholzöl; α -Ionon; β -Ionon; Cinnamylalkohol; 3-Phenylpropanol; Cinnamylacetat; 3-Phenylpropylacetat; α -Iron; cis-3-Hexenol; cis-3-Hexenylacetat; cis-3-Hexenylisobutytrat; Vanillin; Ethylvanillin; 25 Heliotropin; Cumarin; Ambrinol; Indol; 3a,6,6,9a-Tetramethyldodecahydronaphtho[2,1-b]furan; 5-Cyclohexadecen-1-on; 6,7-Dihydro-1,1,2,3,3-pentamethyl-4(5H)-indanon; 8-Cyclohexadecen-1-on; 9-Cycloheptadecen-1-on; Cyclopentadecanon; Cyclohexadecanon.

6. Parfümkomposition nach Anspruch 4 oder 5, wobei der weitere Riechstoff
30 aus der Gruppe von Riechstoffen mit Rosengeruch ausgewählt ist, die besteht aus:

Geranylformiat; Geranylacetat; Geranylpropionat; Geranylisobutytrat; Geranylbutyrat; Geranylisovalerianat; Geranyltiglinat; Geranylbenzoat; Citronellylformiat; Citronellylacetat; Citronellylpropionat; Citronellylisobutytrat; Citronellylbutyrat; Citronellylisovalerianat; Citronellyltiglinat; Citronellylbenzoat; Phenylethylalkohol; Phenylacetaldehyd; Phenylacetaaldehyddimethylacetal; Phenylethylformiat; Phenylethylacetat; Phenylethylpropionat; Phenylethylisobutytrat; Phenylethylbutyrat; Phenylethylpivalat; Phenylethylisovalerianat; Phenylethyl-2-ethylbutyrat; Phenylethyltiglinat; Phenylethylbenzoat; Phenylethylphenylacetat; 2-Phenoxyethylisobutytrat; Geranylmethylether; Rosenoxid; Phenylethylmethylether; Phenylethylethylether; Phenylethylisoamylether; 2-Methoxybenzylethylether; α -Trichlormethylbenzylacetat; $\alpha,3,3$ -Trimethylcyclohexanmethylether; 2,4,6-Trimethyl-3-cyclohexenmethanol; N,N-Diethyl-2-ethylhexansäureamid; 3,7-Dimethyloctanol; Geranylaceton; Linalool; 3,7-Dimethyl-1,6-nonadien-3-ol; Nerolidol; Farnesol; 9-Decenol; 9-Decenylacetat; Decanal; 10-Undecenol; 10-Undecenol; Citronellyloxyacetaldehyd; 3,7-Dimethyloctanylacetaldehyd; 2-Methyl-5-phenylpentanol; 2-Methyl-5-phenylpentanal; 3-Methyl-5-phenylpentanol; Benzophenon; Diphenyloxid; Diphenylmethan; α -Damascon; β -Damascon; δ -Damascon; γ -Damascon; β -Damascenon; 1-(2,4,4-Trimethyl-2-cyclohexenyl)-2-buten-1-on; Rosenöl; Rosenabsolue; Geraniumöl;

7. Parfümkomposition nach einem der Ansprüche 4 – 6, dadurch gekennzeichnet, dass sie keine Riechstoffe umfasst, die aus der Gruppe ausgewählt ist, die besteht aus:

Amylzimtaldehyd, Amylzimtalkohol, Anisalkohol, Benzaldehyd, Benzylalkohol, Benzylbenzoat, Benzylcinnamat, Benzylsalicylat, Citral, Citronellol, Cumarin, Eugenol, Farnesol, Geraniol, Hexylzimtaldehyd, Hydroxycitronellal, Isoeugenol, Lilial, Limonen, Linalool, Lyrat, Methylheptincarbonat, Methylionon, Methyloctincarbonat, Zimtaldehyd, Zimtalkohol, sowie Naturprodukte, welche diese Verbindungen in einer wirksamen Menge enthalten.

8. Parfümkomposition nach einem der Ansprüche 4 – 7, enthaltend 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on, 4,8-Dimethylnonan-2-on oder eine Mischung dieser Verbindungen in einer Menge, die die geruchlichen Eigenschaften einer Mischung der sonstigen Bestandteile der Parfümkomposition in Richtung frischer und/oder strahlender modifiziert.

5

9. Parfümkomposition nach einem der Ansprüche 4 – 8, dadurch gekennzeichnet, dass der Anteil an 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on, 4,8-Dimethylnonan-2-on oder einer Mischung dieser Verbindungen im Bereich von 0,1 – 90 Gew.-%, bevorzugt 0,5 – 70 Gewichtsprozent liegt, bezogen auf die Gesamtmasse der Parfümkomposition.

10

10. Parfümiertes Produkt, umfassend eine Parfümkomposition nach einem der Ansprüche 4 – 8.

11. Verfahren zum Erzeugen eines oder Verstärken des Rosengeruchs einer Parfümkomposition oder eines parfümierten Produkts, wobei der Rosengeruch nicht durch eine Kokosnuß-Geruchsnote begleitet ist, dadurch gekennzeichnet, dass eine sensorisch wirksame Menge von 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on, 4,8-Dimethylnonan-2-on oder einer Mischung dieser Verbindungen mit den sonstigen Bestandteilen der Parfümkomposition vermischt bzw. zu dem Produkt hinzugegeben wird.

15

20

Zusammenfassung:

Beschrieben wird die Verwendung von 4,8-Dimethyl-7-nonen-2-on und 4,8-Dimethylnonan-2-on als Riechstoffe mit einem Rosengeruch. Weiter beschrieben werden entsprechende Parfümkompositionen, parfümierte Produkte und

5 Verfahren zum Erzeugen oder Verstärken eines Rosengeruchs.

**This Page is Inserted by IFW Indexing and Scanning
Operations and is not part of the Official Record**

BEST AVAILABLE IMAGES

Defective images within this document are accurate representations of the original documents submitted by the applicant.

Defects in the images include but are not limited to the items checked:

- ☐ BLACK BORDERS
- ☐ IMAGE CUT OFF AT TOP, BOTTOM OR SIDES
- ☐ ~~FADED~~ TEXT OR DRAWING
- ☒ BLURRED OR ILLEGIBLE TEXT OR DRAWING
- ☒ SKEWED/SLANTED IMAGES
- ☐ COLOR OR BLACK AND WHITE PHOTOGRAPHS
- ☐ GRAY SCALE DOCUMENTS
- ☒ LINES OR MARKS ON ORIGINAL DOCUMENT
- ☐ REFERENCE(S) OR EXHIBIT(S) SUBMITTED ARE POOR QUALITY
- ☐ OTHER: _____

IMAGES ARE BEST AVAILABLE COPY.

As rescanning these documents will not correct the image problems checked, please do not report these problems to the IFW Image Problem Mailbox.